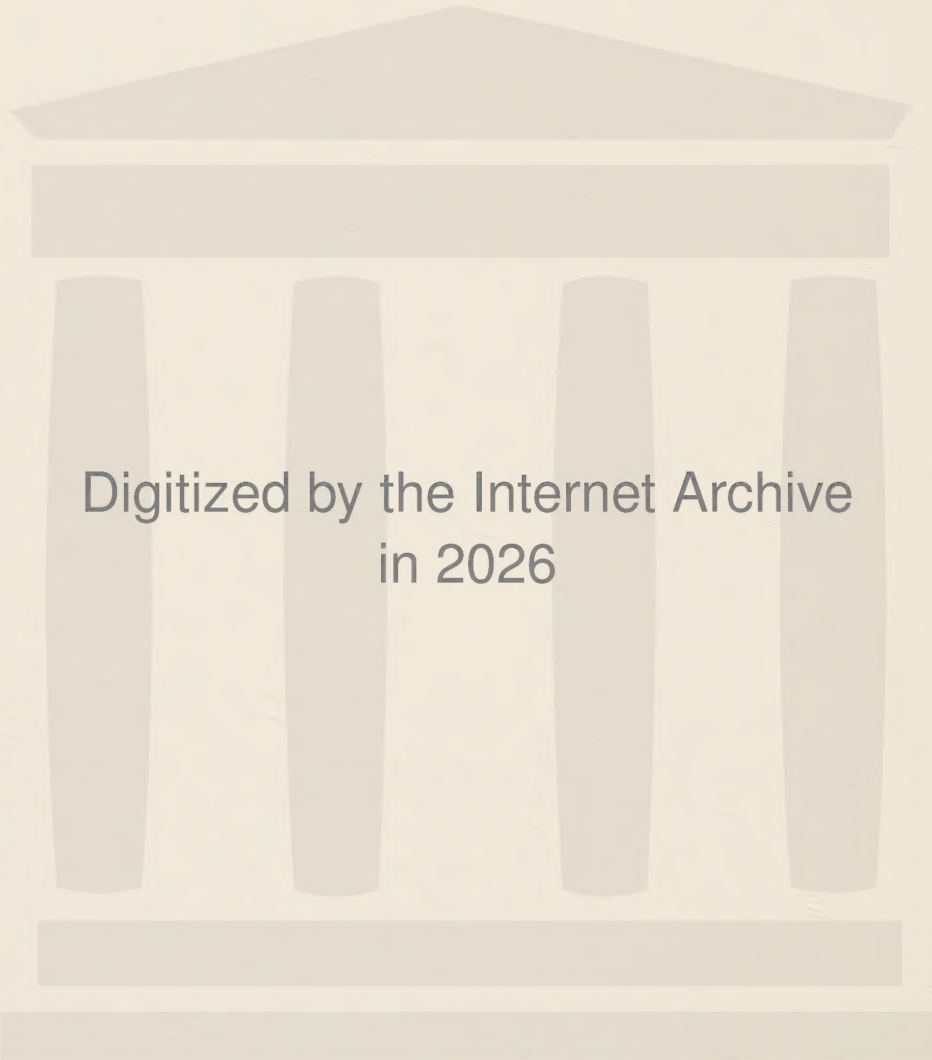


München 1967

Überlappungseffekte an infraroten Spektren

Irmhild Ortrud Tannhäuser



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41547415_0017

Überlappungseffekte an infraroten Spektren

Inaugural-Dissertation

zur Erlangung der Doktorwürde
der hohen naturwissenschaftlichen Fakultät
der Ludwig-Maximilian-Universität
zu München

vorgelegt von

Irmhild Ortrud Tannhäuser
aus Breslau

München 1967

1. Berichterstatter: Professor Dr. Fritz Möller
 2. Berichterstatter: Professor Dr. Dr. Herbert Schober
- Tag der mündlichen Prüfung: 31. 5. 1967



Überlappungseffekte an infraroten Spektren

Von

IRMILD ORTRUD TANNHÄUSER

Meteorologisches Institut der Universität München

Mit 16 Abbildungen

(Eingegangen am 6. Juni 1967)

Zusammenfassung

Um den Einfluß von Überlappungseffekten der Transmissionsfunktionen atmosphärischer Gase für die Bestimmung atmosphärischer Strukturen festzustellen, wird eine einfache Methode zur Bestimmung von Transmissionsfunktionen und zur Berechnung atmosphärischer Spektren aufgebaut. Die Transmissionsfunktionen werden aus neuen Labormessungen abgeleitet.

Untersucht wird der Spektralbereich um $4,5 \mu\text{m}$, wo sich die Banden des CO_2 , N_2O und CO überlappen. Dieser Spektralbereich interessiert insbesondere in Anwendung auf die Marsatmosphäre. Die hier gegebenen Modellrechnungen beziehen sich jedoch auf die Bedingungen der Erdatmosphäre, da entsprechende Meßinstrumente zunächst in der Erdatmosphäre getestet werden. Untersuchungen zur Multiplikativität der Transmissionsfunktionen werden durchgeführt. Das Spektrum der hinausgehenden Strahlung wird berechnet und der Einfluß der Einzelgase auf die erwartete Emission und auf die Gewichtsfunktionen und die Produktfunktionen wird festgestellt.

Die numerischen Ergebnisse enthüllen die große Empfindlichkeit solcher Rechnungen gegenüber der im augenblicklichen Stand der Forschung noch vorhandenen Unsicherheit in den Eingangsparametern und in der Art des anzuwendenden Verfahrens selbst. Die so bedingten Schwankungen der Rechenergebnisse können den Einfluß der Einzelgase in einem Überlappungsgebiet stark verfälschen, und bei schwachen Effekten sogar verdecken.

Summary

In order to find the overlapping effects of transmission functions of atmospheric gases for the determination of atmospheric structures a simple method is developed for the derivation of transmission functions and for the computation of atmospheric spectra. The transmission functions are derived from new laboratory measurements. The spectral region around $4.5 \mu\text{m}$ is studied where CO_2 , N_2O , and CO are overlapping. This spectral region is of special interest with respect to the Martian atmosphere. But the model calculations given here refer to conditions in the terrestrial atmosphere since the corresponding measuring devices are tested first in the earth's atmosphere. Investigations concerning the multiplication property of the transmission functions are carried out. The spectrum of the outgoing radiation is computed, and the effects of the individual gases on the expected emission and on the weighting functions and product functions are ascertained.

The numerical results reveal the great sensitivity of such computations to the still existing uncertainty concerning the basic parameters and to the method used. The variations of the computational results caused by these factors can greatly falsify the influence of the individual gases in a region of overlap and even obscure them completely if the effects are weak.

Résumé

Afin de déterminer l'influence des effets de chevauchement des fonctions de transmission des gaz atmosphériques pour la destination des structures atmosphériques, une méthode simple pour la destination des fonctions de transmission et pour la calculation des spectres atmosphériques est construite.

L'auteur étudie le domaine du spectre au voisinage de 4.5 m où les bandes de CO₂, N₂O et CO se chevauchent. Ce domaine spectral est particulièrement intéressant considérant l'atmosphère de Mars. Les modèles de calcul donnés ici se rapportent bien aux conditions dans l'atmosphère terrestre car des instruments adaptés sont testés à présent dans l'atmosphère terrestre. Des études concernant la multiplicativité des fonctions de transmission sont données. Le spectre du rayonnement sortant est calculé et l'influence des gaz individuels sur l'émission expectée et sur les fonctions de poids et de produit est constatée.

Les résultats numériques mettent en évidence la grande sensibilité de tels calculs à l'incertitude qui existe encore dans l'état actuel de l'exploration concernant les paramètres de base et les procédés de calcul même. Les fluctuations qui apparaissent ainsi dans les résultats du calcul peuvent fausser notablement l'influence des constituants gazeux dans un domaine de chevauchement et même masquer les effets faibles.

I. Einleitung

A. Die Art des Problems

Die Berechnung atmosphärischer Spektren bildet die Grundlage der Interpretation von Messungen der von Planetenatmosphären ausgesandten Strahlung. Solche Berechnungen gehen von der Strahlungsübertragungsgleichung

$$F_{\Delta\nu} = \Phi_{\Delta\nu} \int_U^\infty \varepsilon_{\Delta\nu} B_{\Delta\nu}(T_0) d\tau_{\Delta\nu}(T, p, u) + \Phi_{\Delta\nu} \int_0^U B_{\Delta\nu}[T(z)] d\tau_{\Delta\nu}(T, p, u) \quad (1)$$

aus. Darin ist

ν = Wellenzahl, $F_{\Delta\nu}$ = nach außen gehender Strahlungsstrom im Bereich $\Delta\nu$, T = absolute Temperatur, T_0 = Bodentemperatur an der Stelle U , Φ = Filterfunktion des Meßinstrumentes, ε = Emissionsvermögen der emittierenden Oberfläche bei U , B = PLANCKsche Strahlung, z = Höhe, τ = Transmission, u = effektive Absorbermasse, wobei $du = (c_v dp \cdot \text{const})$, c_v = Volumenmischungsverhältnis, U = gesamte Absorbermasse, p = Druck.

Das wichtigste Glied dieser Gleichung ist die Transmissionsfunktion τ der atmosphärischen Gase. Schon für ein Gas ist die Transmission in der nicht homogenen Atmosphäre schwierig angebbar, da eine Reihe von Variablen eingehen, nämlich die Temperatur, der Gesamtdruck und der Partialdruck des Gases sowie die Absorbermasse. Bei mehreren, gleichzeitig strahlungsaktiven Gasen muß die gegenseitige Überlagerung der Einzeltransmissionen berücksichtigt werden. Wir wollen uns damit beschäftigen, wie dieser Überlagerungseffekt berücksichtigt werden kann und welchen Einfluß die einzelnen Gase in einem Überlagerungsgebiet auf die Spektren und auf deren Interpretation haben.

B. Die Überlappung von Transmissionsfunktionen

BURCH [1] hat die Überlagerung der Transmissionsfunktionen zweier Gase spektroskopisch untersucht. Er hat mit Messungen verhältnismäßig geringer Auflösung an Gemischen von H₂O und CO₂ das sogenannte Multiplikativitätsgesetz nachgewiesen. Danach können die Transmissionen der Einzelgase aus einer Mischung miteinander multipliziert werden, auch wenn die Meßspaltbreite bereits mehrere Linien in einer Bande enthält. Nimmt man an, daß zwei verschiedenartige absorbierende Moleküle nicht miteinander wechselwirken, so gilt für streng monochromatische Strahlung entsprechend dem BOUGUER-LAMBERTschen Extinktionsgesetz

$$\tau_\nu(1 + 2) = \tau_\nu(1) \cdot \tau_\nu(2). \quad (2)$$

Nach den Ergebnissen von BURCH gilt nun für eine bestimmte Auflösung ebenfalls

$$\tau_{Av}(1 + 2) = \tau_{Av}(1) \cdot \tau_{Av}(2). \quad (2a)$$

Die Gültigkeit beider Gleichungen bedingt, daß $\tau_v(1)$ und $\tau_v(2)$ voneinander unabhängig sind, was sicherlich nicht allgemein gilt. GOODY [2] versucht den Effekt dadurch zu erklären, daß in aktuellen Fällen die Linien in den Banden der beiden Absorber statistisch oder in anderer Weise gegenseitig unregelmäßig verteilt sind, und dadurch, daß die in den Messungen vorgenommene Stickstoffverdünnung des Absorbergasgemisches die Wechselwirkung der verschiedenartigen absorbierenden Moleküle verhindert.

BOLLE [3] hat die Gesetze der Multiplikativität an einigen bandenähnlichen, aber sonst geometrisch willkürlichen Verteilungen der Transmission untersucht. Außerdem hat er die Möglichkeit betrachtet, Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten atmosphärischen Spektren durch Überlappungseffekte zu erklären. Entsprechend seinem Vorschlag haben wir versucht, diese Fragen durch Teilung der Spektren in engere Intervalle zu lösen, die Ergebnisse wurden 1965 in einem unveröffentlichten Bericht niedergelegt [4]. Dieser Versuch hat insofern zur Lösung des Problems beigetragen, als folgende Schlüsse gezogen werden konnten:

1. Zu suchen ist eine theoretische Darstellung der Transmissionsfunktionen, die sowohl einfach ist, als auch eine Simulation des atmosphärischen Emissionsspektrums gestattet.
2. Notwendig ist die experimentelle Kontrolle jedes theoretischen und rechnerischen Lösungsversuches des Überlappungsproblems, und zwar durch
 - a) Labormessungen der Transmission der speziell betrachteten *einzelnen* atmosphärischen Gase für eine repräsentative Auswahl der Bedingungen der geplanten Anwendung auf atmosphärische Probleme, und
 - b) Labormessungen an *Mischungen* von Gasen, korrespondierend zu den Messungen an den Einzelgasen.

Dies sind die Ausgangspunkte der vorliegenden Arbeit.

C. Formale Darstellungsmöglichkeiten von Transmissionsspektren

Die Molekülspektren können hier nicht auf rein quantentheoretischem Wege beschrieben werden, sondern bestimmte Modelle über Linienform und unter Umständen auch über Linienanordnung müssen verwendet werden und zusätzlich auch experimentell zu bestimmende Größen. Es bestehen die folgenden Darstellungsmöglichkeiten:

1. Durch die direkte Methode.
2. Durch Bandenmodelle.
 - a) mit Bandenmodellparametern aus hauptsächlich quantentheoretischen Beziehungen.
 - b) mit experimentell abgeleiteten Bandenmodellparametern nach OPPENHEIM und BEN ARYEH (1964) [5].

Zu 1.

Die Transmission über die inhomogenen Wege in einer Atmosphäre wird bestimmt durch numerische Integration der Gleichung

$$\tau_\nu(\int du) = \exp \int [-k_\nu(p, T) du(p, T)].$$

mit Unterteilung in homogene Wege. Es ist k_ν = monochromatischer Absorptionskoeffizient, T = Temperatur, p = Druck, u = Absorbermasse, ν = Wellenzahl.

Im monochromatischen Absorptionskoeffizienten werden im allgemeinen Stoßverbreiterung und Dopplereffekt berücksichtigt (VOIGT-Profil) [6]. Die Überlagerung der Flügel benachbarter Linien ist zu beachten. Hierfür wurden von SAKAI [7], [8] und PLASS [9] Lösungen angegeben. Die Überlagerung der Absorption verschiedener Gase kann durch Multiplikation der monochromatischen Einzeltransmissionen berücksichtigt werden — jedoch nur unter der Annahme, daß die verschiedenartigen Moleküle nicht wechselwirken (siehe Abschnitt IB). Es ist kompliziert, beim VOIGT-Profil die Integration für diejenigen Werte der Halbwertsbreiten durchzuführen, die in Planetenatmosphären auftreten, da der Absorptionskoeffizient des VOIGT-Profiles für diese Werte schwierig zu berechnen ist [10]. — Für die rechnerische Variation der Parameter Masse und Temperatur muß bei der direkten Methode mit den Berechnungen immer wieder von Anfang an begonnen werden, da diese bereits in die Berechnung des Absorptionskoeffizienten eingehen. Hinzu kommt, daß häufig einige Grundparameter wie Halbwertsbreiten und Linienstärken nicht oder nur mit unzureichender Genauigkeit bekannt sind [11], und erst in sehr komplizierter Weise berechnet werden müssen [12], [13], [14].

Überdies ist die Integration über breite Spektralintervalle an sich schon äußerst zeitraubend. Diese Tatsachen lassen die direkte Methode für die praktische Anwendung in der Interpretation von Spektren als wenig geeignet erscheinen.

Zu 2.

Mit dem Bandenmodellprinzip versucht man, die Schwerfälligkeit des direkten Verfahrens zu überwinden. Das Problem ist, das Quellspektrum, wie es durch den optischen Weg im Labor oder in einer Planetenatmosphäre von den Strahlungsquellen zum Meßinstrument übertragen und bei der Aufnahme modifiziert wird, ausreichend gut darzustellen. Die mittlere Transmission für das ELSASSER-Modell mit LORENTZ-Linienform ist gegeben durch

$$\tau_{\Delta\nu}(\beta, y) = 1 - \sinh \beta \int_0^y \exp(-t \cosh \beta) J_0(it) dt \quad (3)$$

und für das statistische Modell mit LORENTZ-Linienform durch

$$\tau_{\Delta\nu} = \exp[-\beta x e^{-x} [I_0(x) + I_1(x)]] \quad (4)$$

Es sind

$$\beta = \frac{2\pi \alpha_L}{d}, \quad y = \frac{S u}{\sinh \beta}, \quad x = \frac{S^0 p' L}{2\pi \alpha_L}, \quad \tau_{Av} = 1 - A_{Av},$$

wobei

A = Absorption, $\alpha_L [\text{cm}^{-1}]$ = Halbwertsbreite für LORENTZ-Linienform, d = mittlerer Linienabstand, $S^0 [\text{cm}^{-2} \text{ atm}^{-1}]$ = integrierte Intensität einer Linie unter Normalbedingungen sind. I_0, I_1 sind modifizierte BESSEL-Funktionen, $u [\text{atm} \cdot \text{cm}]$ = optischer Weg des Absorbers. Es gilt $L = \frac{p'}{u}$ und $p_e = p + (B - 1) p'$ für Rechnungen über homogene Wege. Dabei sind $p_e [\text{atm}]$ = äquivalenter Druck (der wirksame, die Linie verbreiternde Druck), $p' [\text{atm}]$ = Partialdruck des absorbierenden Gases, $p' [\text{atm}]$ = Gesamtdruck des Gasgemisches, B = Selbstverbreiterungskoeffizient, J_0 = Besselfunktion.

Bei Bandenmodellrechnungen über inhomogene Wege wird im allgemeinen die CURTIS-GODSON-Approximation (Abschnitt II C)

$$\tilde{p}_e = \frac{\int p_e \cdot du}{\int du} \quad (5)$$

angewandt. Sie ist die erste Näherung der weithin unbekannten VAN DE HULST-Technik; diese Technik erlaubt genaue Rechnungen über inhomogene Wege auch mit dem Bandenmodellprinzip [24], [15] und mit gemischten Linienprofilen.

Durch die Änderung der atmosphärischen Bedingungen auf dem Strahlungsübertragungsweg ändert sich das Quellspektrum: Unter den verschiedenen Druck-, Massen- und Temperaturbedingungen sind die einzelnen Energieniveauübergänge verschieden wirksam. Der optische Weg überträgt nicht ein mittleres Spektrum, sondern die Mittellung wird erst durch das Meßinstrument am Ende des optischen Weges durchgeführt. Die Bestimmung der Mittelwerte von S, d, α oder von deren Kombinationen erfordert einen geeigneten Gesichtspunkt für die Mittelwertbildung. Es ist schwierig (Abschnitt IV B), die beste Art der Mittelwertbildung zu diskutieren. Am wirksamsten dürfte es sein, die Rechnungen an Messungen mit genau bekannten experimentellen Bedingungen, also an Labormessungen zu überprüfen.

- a) Bei Bandenmodellrechnungen mit hauptsächlich quantentheoretisch abgeleiteten Parametern wird im allgemeinen mit irgendwelchen Mittelwerten von S, d, α gearbeitet und dem errechneten Strahlungsfluß wird dann noch eine Spaltfunktion überlagert. Dadurch wird die spektrale Struktur wahrscheinlich zu stark geglättet (siehe Abschnitt IV B).

Der Vergleich von gemessenen und berechneten Spektren zeigt in der spektralen Transmission noch Unterschiede bis zu 40% [16]. Die Bestimmung der Bandenmodellparameter erfordert großen Rechenaufwand [12], [13], [14]. Mit der Gesamtbandenabsorption geht außerdem eine sowohl theoretisch, als auch experimentell bestimmbare Größe ein. Die Berechnung der Linienstärke ist von den atmosphärischen Bedingungen abhängig; diese Berechnung muß daher bei jeder Variation der atmosphärischen Bedingungen neu durchgeführt werden. Wegen aller dieser Nachteile wenden wir das Verfahren nicht an.

- b) Bei Bandenmodellrechnungen mit experimentell abgeleiteten Parametern spielt das Problem der Spaltfunktion keine Rolle, solange in der Rechnung die gleiche Auflösung bzw. Spaltfunktion angenommen wird, wie in der Messung. Das läßt sich daran zeigen,

daß die Übereinstimmung zwischen gemessenen und berechneten Spektren gut ist (siehe Abschnitt III B). Die Bandenmodellparameter werden in folgender Weise aus den Labormessungen abgeleitet: Aus den Meßpunkten werden Kurven gezeichnet, von denen Teilstücke asymptotisch zu den in den Gleichungen (3) und (4) gegebenen theoretischen Kurven verlaufen. Der Schnittpunkt der Asymptoten dieser Kurven gibt dann die Parameter. Mit diesen Parametern kann dann nach den Gleichungen (3) und (4) die Transmission auch für andere Bedingungen als die der Messungen berechnet werden. Die Methode arbeitet nicht nur genau, sondern man kann damit auch bei rascher rechnerischer Variation der atmosphärischen Bedingungen arbeiten. Sie erscheint uns deshalb als das für die Interpretation geeignete Verfahren, insbesondere dann, wenn einige verallgemeinernde Erweiterungen und Abänderungen eingeführt werden können; diese sind:

- α) *Die direkte Anpassung.* Die Parameter werden dabei bestimmt durch Suchen nach bester Übereinstimmung zwischen den Meßwerten und der vollständigen Formel (3) oder (4), und nicht durch Verwenden der Asymptoten. Dadurch können auch die Fälle berücksichtigt werden, in denen nicht ausreichend viele Meßwerte für die Konstruktion der Asymptoten vorhanden sind.
- β) *Berücksichtigung des VOIGT-Profiles.* Eine Beziehung zwischen den unter den experimentellen Gültigkeitsbedingungen des LORENTZ-Profiles abgeleiteten Bandenmodellparametern und der bekannten Darstellung des VOIGT-Profiles [17] ist zu entwickeln.
- γ) *Allgemeine Rechnung für inhomogene Wege.* Die experimentell abgeleiteten Bandenmodellparameter müssen auch in der VAN DE HULST-Technik verwendet werden können.

Mit diesem Verfahren werden wir arbeiten. Wir führen noch eine *Normierung zur Anwendung auf Messungen an Mischungen* ein: Zur Untersuchung des Überlappungseffektes mit Labormessungen ist eine spezielle Normierung der Darstellung der Meßwerte nach (3) und (4) günstig. Dadurch werden wir unabhängig von der sonst für solche Untersuchungen notwendigen Einhaltung strenger Meßbedingungen. Wir müssen nur noch die relativen Mischungsverhältnisse der Gase in den Messungen an Mischungen konstant halten, wogegen sonst sowohl die Partialdrucke der absorbierenden Gase als auch der Gesamtdruck bei den zu vergleichenden Messungen streng gleich sein müssen [18].

D. Zur Interpretation von Spektren

Bei vereinfachenden Annahmen hängt die von einem Satelliteninstrument empfangene Strahlung nur von der Absorption und Emission der atmosphärischen Gase und vom Emissionsvermögen der Erdoberfläche oder von Wolken ab. Sie stammt für jede Wellenlänge (hauptsächlich) aus einer anderen atmosphärischen Schicht. Wenn aus Messungen ein Temperaturprofil abgeleitet werden soll, müssen daher Messungen bei verschiedenen Wellenlängen genommen werden. Zur Kennzeichnung der Höhe der hauptsächlich emittierenden

Schicht wird die sogenannte Gewichtsfunktion $\left(\frac{d\tau}{dh}\right)$ verwendet, geeigneter ist die sogenannte Produktfunktion $\left(\frac{d\tau}{dh} \cdot B\right)$, der vollständige Term aus der Strahlungsübertragungsgleichung (1).

Die Rückschlüsse auf Temperatur- oder Massenverteilung (Inversionsverfahren) erfolgen durch Vergleich von gemessenen und berechneten Spektren über eine Umkehr der Strahlungsübertragungsgleichung [16], [19], [20]. Die Konvergenz der entsprechenden Lösungen hängt von den Unterschieden in der Transmission der einzelnen atmosphärischen Niveaus zum Weltraum hin ab, also von den relativen Werten der sogenannten Gewichtsfaktoren $\Delta\tau$ [16].

Für die Inversionsexperimente muß in einem Bereich der Bandenüberlappung mehrerer Gase, insbesondere bei unsicheren Massenverteilungen, der mögliche Einfluß der Einzelgase auf das zu berechnende Spektrum, auf die Gewichtsfunktion, und auf die Gewichtsfaktoren bestimmt werden können.

II. Transmissionsfunktionen aus spektroskopischen Labormessungen

A. Das Prinzip

Die mittlere Transmission in einem Spektralintervall sei darstellbar durch ein Bandenmodell, gegeben durch die Gleichungen (3) und (4). Die Darstellung des Statistischen Modells enthält den Term für die Äquivalentbreite W einer Linie; wir erhalten aus (4):

$$\tau_{\Delta\nu} = \exp - \frac{W}{d} \quad \text{und} \quad -\ln \tau_{\Delta\nu} = \frac{W}{d} . \quad (6)$$

Beschränkt man sich im ELSASSER-Modell auf den Fall sich nicht überlappender Linien, $\alpha \ll d$, so ist [21]:

$$A_{\Delta\nu} = \beta x f(x) = \frac{W}{d} . \quad (7)$$

Die beiden Gleichungen (6), (7) enthalten durch die Äquivalentbreite einer Linie den Term $f(x)$ für die LADENBURG-REICHE-Wachstumskurve. Entnimmt man $A_{\Delta\nu}$ aus Messungen von Laborspektren, so kann man aus der Schar der Meßwerte bei verschiedenen Drucken und Massen für $\Delta\nu$ eine druckreduzierte LADENBURG-REICHE-Wachstumskurve zeichnen, indem man je nach dem anwendbaren Modell $\frac{A_{\Delta\nu}}{p_e}$ oder $-\frac{\ln \tau_{\Delta\nu}}{p_e}$ gegen die Absorbermasse $L_e = \frac{u}{p_e}$ abträgt [5]. Hier ist berücksichtigt, daß die Labormessungen nicht in dem reinen Absorbergas gemacht werden, sondern daß ein Gemisch des Absorbergases mit einem druckverbreiternden, aber nicht absorbierenden Gas verwendet wurde. An die Stelle des Gesamtdruckes $p = p'$ eines reinen Absorbergases tritt der Äquivalentdruck p_e des Gasgemisches. Die Breite des Spektralintervalls $\Delta\nu$, für welche die jeweilige LADENBURG-REICHE-Kurve gilt, ist gegeben durch die Auflösung der Messung. Die Asymptoten dieser Kurve sind bekanntlich in der ersten Näherung

$$W = S^0 L_e p_e \quad \text{„linearer Bereich“} \quad (8)$$

$$W = 2 p_e (S^0 \alpha_L^0 L_e)^{1/2} \quad \text{„Quadratwurzelbereich“} \quad (8a)$$

wo $\alpha_L^0 = \text{Halbwertsbreite}$ für LORENTZ-Linienform unter Normalbedingungen. Man führt die Parameter

$$U = \frac{2\pi\alpha_L^0}{d}, \quad V = \frac{S^0}{2\pi\alpha_L^0}$$

ein. Die Werte dieser Parameter lassen sich aus dem Asymptotenschnittpunkt bestimmen. Es kann leicht gezeigt werden, daß dabei keine Kenntnis des mittleren Linienabstandes d notwendig ist. Gleichung (6) basiert zwar auf der Annahme einer speziellen Verteilung der Linienintensitäten, SOSHIKOV [22] hat aber gezeigt, daß die Lage der Asymptoten unabhängig von der Verteilung der Linienintensitäten ist. Also sind auch U und V unabhängig davon und sie sind nicht auf ein spezielles Bandenmodell beschränkt. Da $A_{\Delta\nu}$ entsprechend der spektralen Auflösung der Messungen der Mittelwert der Absorption im Intervall $\Delta\nu$ ist, sind auch U, V als Mittelwerte über $\Delta\nu$ zu betrachten. Sehr häufig liegen nicht genügend Messungen für die Asymptotenbereiche der Wachstumskurve vor. Deshalb leiten wir U und V nicht aus dem Asymptotenschnittpunkt ab, sondern aus der Wachstumskurve selbst. Durch die Angleichung der Meßwerte $A_{\Delta\nu}$ an die Formel der Wachstumskurve nach der Methode der kleinsten Quadrate werden die Werte für U und V bestimmt. Dies geschieht durch eine sogenannte fit-Prozedur auf einer elektronischen Rechenmaschine.

Auf diesem Wege werden die Werte von U und V für aufeinanderfolgende enge Spektralintervalle über den ganzen Bereich der Bande jedes beteiligten Gases abgeleitet; man erhält Verteilungen von U und V (siehe Abschnitt III) in Abhängigkeit von ν .

Zur Berechnung der Transmission über homogene Wege aus U und V müssen die Gleichungen (3) und (4) in konvergenten Reihen dargestellt werden. Dies erreichen wir durch die Anwendung der Formel von SEITZ und LUNDHOLM [23] für das ELSASSER-Modell

$$A_{\Delta\nu} = \sinh G \sum_{r=0}^n \left[\frac{(2r)!}{(r!)^2 2^{2r} (\cosh G)^{2r+1}} \right] \cdot \left[1 - (\exp(-Y \cosh G)) \cdot \sum_{m=0}^{2r} \frac{1}{m!} (Y \cosh G)^m \right] \quad (9)$$

und durch Anwendung der Reihenentwicklungen für modifizierte BESSEL-Funktionen auf das statistische Modell

$$A_{\Delta\nu} = 1 - \exp \left[-GX \exp(-X) \sum_{r=0}^n \frac{1}{(r!)^2} \left(\frac{X}{2} \right)^{2r} + \frac{1}{r!(1-r)!} \left(\frac{X}{2} \right)^{1+2r} \right]. \quad (10)$$

Hierbei ist

$$G = pU, \quad X = \frac{uV}{p}, \quad Y = \frac{XG}{\sinh G}, \quad u = \sum_1^i \Delta u_i. \quad (11)$$

B. Erweiterung für gemischte Linienprofile

Die Untersuchungen des vorigen Abschnittes gelten nur für Banden, deren Linien den Spezialfall des LORENTZ-Profiles haben. Tragen sowohl Stoßverbreiterung als auch Dopplereffekt zur Linienform bei, so ist das VOIGT-Profil anzuwenden. In der Erdatmosphäre ist das oberhalb des Niveaus von etwa 10 mb der Fall. Die Parameter U und V müssen dann für diese allgemeinen Bedingungen abgeändert werden in U_m und V_m . Wir führen dazu in die Asymptotengleichungen (8) und (8a) die unter Laborbedingungen abgeleiteten Werte von U und V ein und erhalten so:

$$\frac{W}{d} = u U V \quad (12)$$

für den linearen Bereich, und

$$\frac{W}{d} = \left(p_e u \frac{2}{\pi} V U^2 \right)^{1/2} \quad (13)$$

für den Quadratwurzelbereich.

Wir definieren nun die neuen Parameter U_m und V_m dergestalt, daß sie die Funktion $f(x)$ der Wachstumskurve bzw. deren Asymptoten befriedigen für den Fall, daß gemischte Linienprofile anzusetzen sind.

Nach PLASS, FIVEL [17] haben im linearen Bereich die Linienformen keinen Einfluß auf die Äquivalentbreite einer Linie. Es gilt also

$$\frac{W}{d} u (U V) = u (U_m V_m) = \frac{W_m}{d} . \quad (12a)$$

Daraus entnimmt man

$$(U V) = (U_m V_m) . \quad (12b)$$

Im Quadratwurzelbereich ist die Äquivalentbreite W_m einer Linie mit VOIGT-Profil nach [17] darstellbar durch

$$\frac{W_m}{d} = \frac{2}{d} (S^0 p_e \alpha_L u)^{1/2} \left[1 + \frac{3}{16} a^{-2} x^{-1} + \frac{45}{512} a^{-4} x^{-2} - \frac{3}{32} a^{-2} x^{-2} + \dots \right]$$

und in der Formulierung mit U und V erhalten wir

$$\frac{W_m}{d} = \left(p_e u \frac{2}{\pi} V U^2 \right)^{1/2} \cdot \left[1 + \frac{3}{16} U^{-2} V^{-1} N^{-2} u^{-1} + \frac{45}{512} U^{-4} V^{-2} N^{-4} u^{-2} - + \dots \right], \quad (13a)$$

wobei gilt

$$a = \frac{\alpha_L}{\alpha_D} (\ln 2)^{1/2}, \quad \alpha_D = \frac{(2kT \ln 2)^{1/2}}{(mc^2)^{1/2}} \cdot v_0 \quad (14)$$

$$x = \frac{S^0 u}{2\pi \alpha_L^0} = V \cdot u$$

$$\alpha_L^0 = \frac{d}{2\pi} U$$

$$a = U \cdot N \quad \text{mit} \quad N = \frac{d \cdot U (mc^2)^{1/2}}{2\pi (2kT)^{1/2} \cdot v_0} .$$

Es ist

v_0 = Wellenzahl im Zentrum der Linie,

c = Lichtgeschwindigkeit,

k = BOLTZMANN-Konstante,

T = absolute Temperatur.

Indices L bzw. D bezeichnen LORENTZ- bzw. DOPPLER-Linienprofil. Entsprechend unserer Definition müssen wir jetzt für das gemischte Linienprofil setzen:

$$\begin{aligned} \frac{W_m}{d} &= \left[p_e u \frac{2}{\pi} (V_m U_m) U_m \right]^{1/2} \\ &= \left[p_e u \frac{2}{\pi} (V U) U \right]^{1/2} \left[1 + \frac{3}{16} U^{-2} \cdot V^{-1} N^{-2} u^{-1} + \frac{45}{512} U^{-4} V^{-2} N^{-4} u^{-2} - + \dots \right] \end{aligned} \quad (13b)$$

Daraus erhält man unter Verwendung von (12b):

$$\begin{aligned} U_m &= U \left[1 + \frac{3}{16} U^{-2} V^{-1} N^{-2} u^{-1} + \frac{45}{512} U^{-4} V^{-2} N^{-4} u^{-2} + \dots \right]^2 \\ V_m &= V \left[1 + \frac{3}{16} U^{-2} V^{-1} N^{-2} u^{-1} + \frac{45}{512} U^{-4} V^{-2} N^{-4} u^{-2} + \dots \right]^{-2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Auf diese Weise sind die Parameter U_m , V_m für das VOIGT-Profil aus den Parametern U , V , welche nur für das LORENTZ-Profil gelten, berechenbar. Da U und V Mittelwerte über das Spektralintervall $\Delta\nu$ sind, setzen wir für ν_0 in den Gleichungen (14) den Wert des Zentrums von $\Delta\nu$ an und führen die Annahme ein, daß sich in $\Delta\nu$ nur eine einzige hypothetische Linie befindet.

Mit den so bestimmten Werten von U_m , V_m kann man nun durch die Bandenmodellformeln [3], [4] bzw. [9], [10] die mittlere Absorption im Spektralintervall $\Delta\nu$ bei gemischtem Linienprofil errechnen.

Manchmal ist es bequemer, statt der Bandenmodellformeln nur deren Approximationen im linearen und Quadratwurzelbereich zu verwenden. Bei beiden Bandenmodellen sind diese über die Äquivalentbreite W einer Linie formulierbar [21] und damit der Rechnung mit den Parametern U , V bzw. U_m , V_m gemäß den Gleichungen (12) bis (15) in sehr einfacher Weise zugänglich.

C. Erweiterung für inhomogene Wege

Die Ableitungen der vorausgehenden beiden Abschnitte gelten zunächst nur für optisch homogene Wege. Die Deformation eines Linienprofils bei der Strahlungsübertragung über einen inhomogenen Weg kann mit der Fouriertransformation beschrieben werden [15]. Das VOIGT-Profil resultiert aus einer Faltung von LORENTZ- mit DOPPLER-Profil; es ist

$$f(t) = S \cdot u \cdot \exp(-\alpha_L \cdot t) \quad = \text{Fouriertransformierte des LORENTZ-Profiles} \quad (16)$$

$$f(t) = S \cdot u \cdot \exp\left(-\frac{1}{4} \alpha_D^2 \cdot t^2\right) \quad = \text{Fouriertransformierte des DOPPLER-Profiles} \quad (17)$$

$$f(t) = S \cdot u \cdot \exp\left(-\alpha_L t - \frac{1}{4} \alpha_D^2 \cdot t^2\right) = \text{Fouriertransformierte des VOIGT-Profiles.} \quad (18)$$

Wegen der Variation der atmosphärischen Parameter entlang des optischen Weges ersetzt man in (18) u durch eine Integration:

$$f(t) = \int S \exp\left(-\alpha_L \cdot t - \frac{1}{4} \alpha_D^2 \cdot t^2\right) du. \quad (19)$$

Daraus erhält man durch Einführung der Parameter U und V :

$$f(t) = \int U \cdot V \cdot d \cdot \exp\left(-\frac{d \cdot U}{2\pi} - \frac{1}{4} \alpha_D^2 \cdot t^2\right) du.$$

Das Ergebnis betrachtet man wiederum als Fouriertransformierte eines VOIGT-Profiles, dessen Parameter definiert werden durch

$$f(t) = \tilde{S} \cdot \tilde{u} \cdot \exp\left(-\alpha_L \cdot t - \frac{1}{4} \tilde{\alpha}_D^2 \cdot t^2\right)$$

also

$$f(t) = (U \cdot V \cdot d) \cdot \tilde{u} \cdot \exp\left(-\frac{d \cdot U}{2\pi} \cdot t - \frac{1}{4} \tilde{\alpha}_D^2 \cdot t^2\right). \quad (20)$$

$\tilde{S}$, $\tilde{u}$ sind die für den optischen Weg reduzierten Werte von S und u . Der Vergleich von Potenzen von t führt auf die CURTIS-GODSON-Approximation (erste Näherung) [Gleichung (5)] oder auf Approximationen höherer Ordnung [24].

Für unsere Rechnungen haben wir uns auf die CURTIS-GODSON-Approximation beschränkt. Dort läßt sich die Reduktion über die Halbwertsbreite auf den Druck übertragen: mit

$$\tilde{\alpha} = \frac{\int \alpha \, dm}{\int dm} \text{ und } \frac{\alpha}{\alpha_0} = \frac{p}{p_0} \quad (21)$$

erhält man die Gleichung (5)

$$\tilde{p} = \frac{\int p \, dm}{\int dm}.$$

D. Temperaturabhängigkeit

Für die Anwendung der Transmissionsfunktionen auf die Interpretation von spektroskopischen Messungen in planetaren Atmosphären spielt die Temperaturabhängigkeit der Transmission dann eine Rolle, wenn sie gegen die Temperaturabhängigkeit der PLANCK-Funktion nicht zu vernachlässigen ist. Das ist eine Frage der Wellenlänge und der Temperaturverteilung in der betreffenden Atmosphäre. Es muß im Inversionsproblem immer das Integral $\int B_\nu(T) \, d\tau(T, p, m)$ gemäß Gleichung (1) betrachtet werden. Approximationen für die PLANCK-Funktion können immer gefunden werden. Zur Bestimmung der Temperaturabhängigkeit müssen Spektren bei verschiedenen Temperaturen aufgenommen werden und die Parameter für jeweils eine Temperatur abgeleitet werden. Im Schema der Parameter für den Bereich der fraglichen Temperatur kann dann interpoliert werden.

Unsere Untersuchungen sollen zunächst auf den $4,5 \mu\text{m}$ Bereich in der Erdatmosphäre angewandt werden. Hier ist die Temperaturabhängigkeit der PLANCK-Funktion sehr hoch. Wird $B_\nu \sim T^{\alpha_\nu}$ gesetzt, so zeigt Tab. 1, daß sie bei weitem die der Transmissionsfunktionen übersteigen dürfte.

Tabelle 1

T (°K)	$\alpha_\nu (\lambda = 4 \mu)$	$\alpha_\nu (\lambda = 5 \mu)$
180 bis 190	19,4	15
270 bis 280	13,0	10
310 bis 320	11,4	9

Wir können deshalb die Temperaturabhängigkeit der Transmissionsfunktionen in unseren Untersuchungen vernachlässigen.

III. Überlappungseffekte und Labormessungen im 4.5 μm Bereich

A. Bestimmung des Überlappungseffektes

Die Anwendbarkeit des Multiplikativitätsgesetzes von BURCH (siehe Abschnitt I B) ist verbunden mit der Annahme, daß der gegenseitige Verbreiterungseffekt der einzelnen Absorbergase nicht sehr verschieden ist von dem des nicht absorbierenden Verbreiterungsgases. Der Verbreiterungseffekt des Stickstoffes wird dadurch berücksichtigt, daß für ein Gasgemisch der Gesamtdruck, der bei einem reinen Absorbergas anzusetzen wäre, ersetzt wird durch den sogenannten Äquivalentdruck [26]:

$$p_e = p + (1 - B) p'.$$

Bei n Absorbergasen in einer Mischung setzen wir zunächst

$$p_e = p + \sum_{i=1}^n (1 - B_i) p_i'. \quad (22)$$

Aus den Messungen an Einzelgasen (in Mischung mit N_2) können Wachstumskurven gezeichnet werden (siehe Abschnitt II A). Die Frage ist nun, ob auch für Gasgemische Wachstumskurven konstruiert werden können und ob die Multiplikativität der Überlappung daran untersucht werden kann: Wir betrachten dazu die Mischung probeweise als *eine* Gasart und arbeiten daher bei allen Messungen mit den gleichen Mischungsverhältnissen der einzelnen absorbierenden Komponenten zueinander. Die absorbierende Gesamtmasse in einer Messung wird bestimmt durch Normierung der Teilgasmassen:

$$u_{\text{norm}} = \frac{u_i}{a_i} = \frac{u_{i+1}}{a_{i+1}} (\neq \text{const}) \quad (23)$$

wo i das absorbierende Teilgas kennzeichnet, und a_i den vom Gas abhängigen Normierungsfaktor.

Aus (23) folgt

$$c = \frac{u_{i, \text{norm}}}{u_{i+1, \text{norm}}} = \frac{u_i}{u_{i+1}} = \frac{a_i}{a_{i+1}} \quad (24)$$

d.h. die Normierung (23) ist durch den Wert von c eine Kennzeichnung für das Gasgemisch. Entsprechend diesen Überlegungen haben wir für die von uns verwendeten Messungen von LEUPOLT [25] die entsprechenden konstanten relativen Mischungsverhältnisse c gemäß (24) gewählt. Weiterhin haben wir die relativen Mischungsverhältnisse so gewählt, daß sie mit den relativen Mischungsverhältnissen in der Erdatmosphäre übereinstimmen. Diese Messungen haben wir nach Einführung der Normierung in Wachstumskurvendarstellung aufgetragen. Das Ergebnis ist, daß sich für Mischungen tatsächlich Wachstumskurven zeichnen lassen: die Kurven M in Abb. 1. Es ist nun zu prüfen, wie sich in dieser Darstellung die Multiplikativität der Bandenüberlappung nachprüfen läßt. Dazu haben wir die Normierung (23) auch auf die Messung an den Einzelgasen angewandt und diese in die gleichen Diagramme mit-eingezeichnet. Die Ordinate ist $\frac{A_{\Delta\nu}}{p_e} = \bar{A}$. Bei Multiplikativität gilt:

$$\tau_{\Delta\nu, m} = \tau_{\Delta\nu, 1} \cdot \tau_{\Delta\nu, 2} \cdot \tau_{\Delta\nu, 3} \quad (25)$$

$$(1 - \bar{A}_m p_{e, m}) = (1 - \bar{A}_1 p_{e, 1}) \cdot (1 - \bar{A}_2 p_{e, 2}) \cdot (1 - \bar{A}_3 p_{e, 3}). \quad (26)$$

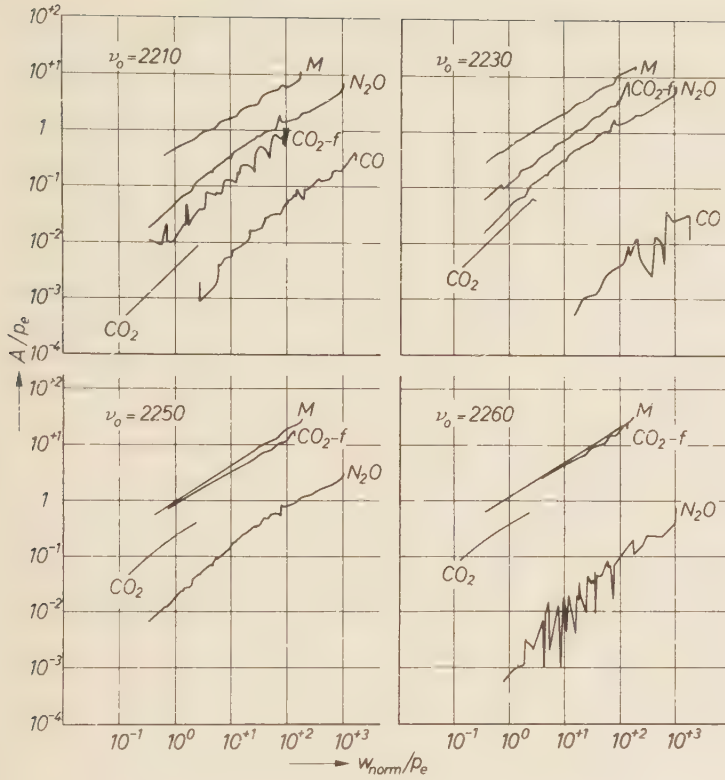


Abb. 1. Normierte Wachstumskurven. p_e = Äquivalentdruck; A = mittlere Absorption im Spektralintervall $\Delta\nu$; ν_0 = Wellenzahl, in der Mitte des Spektralintervalls $\Delta\nu$; w_{norm} = normierte Absorbermasse. M : gemessene Wachstumskurve für das Gasgemisch N_2O , CO_2 , CO ; CO_2-f : Wachstumskurve, die aus abweichenden Messungen gezeichnet wurde. Die Zacken der Kurven sind bedingt durch die Streuung der Meßwerte, da die zeichnende Maschine alle Punkte durch Linien verbunden hat. Die Streuung der Meßwerte ist besonders hoch bei geringen Werten der Absorption A

Der Vergleich muß also bei den Abszissen

$$\begin{aligned} L_{e,m} &= \frac{w_m}{p_{e,m}}, & L_{e,1} &= \frac{w_{1,\text{norm}}}{p_{e,1}} \\ L_{e,2} &= \frac{w_{2,\text{norm}}}{p_{e,2}}, & L_{e,3} &= \frac{w_{3,\text{norm}}}{p_{e,3}} \end{aligned} \quad (27)$$

durchgeführt werden. Die $L_{e,i}$ sind berechenbar aus dem wählbaren $L_{e,m}$ gemäß der Beziehung

$$L_{e,i} = L_{e,m} \frac{\left(p + \sum_{i=1}^n (1 - B_i) p_i' \right)}{(p + (1 - B_i) p_i')} \quad (28)$$

wobei p der Gesamtdruck ist, welcher beim Vergleich von Mischung und Einzelmessung der gleiche sein muß.

Leider ist es uns nicht gelungen, die Multiplikativität anhand der in Abb.1 gegebenen Kurven nachzuweisen. Es zeigte sich nämlich, daß wir beim Gas CO_2 zwei verschiedene Wachstumskurven erhielten: CO_2 und CO_2-f , wovon die letztere hier als gestört betrachtet wird (siehe Abschnitt III B). Die Kurve CO_2-f geht bei der Wellenzahl $\nu_0 = 2260 \text{ cm}^{-1}$ in die Kurve der Mischung über, ein Hinweis, daß die Meßwerte der Kurve M der gleichen Abweichung unterliegen. Wir fanden, daß die Kurven M und CO_2-f ausschließlich aus denjenigen Messungen bestehen, die mit einer bestimmten (4 Meter langen) Absorptionszelle gemacht worden waren. Die Kurven CO_2 , N_2O , CO hingegen wurden mit anderen (und kürzeren) Zellen aufgenommen. Dennoch können wir in unseren weiteren Untersuchungen Multiplikativität annehmen, da HOOVER und Mitarbeiter [18] im betrachteten Spektralbereich und bei etwas geringer Auflösung diese im Rahmen der Meßgenauigkeit ($\pm 5\%$) gefunden haben.

B. Diskussion und Ergebnisse von Labormessungen

Entsprechend der Theorie (Abschnitt II A) haben wir die Bandenmodellparameter U und V aus den Laborspektren von LEUPOLT [25] abgeleitet. Das Ergebnis zeigt Abb.2. In den äußeren Flügeln der Banden können wir keine Werte angeben, da dort der Meßausschlag zu klein und deshalb zu ungenau war. Einige Zacken haben mit der Bandenstruktur nichts zu tun und sind nur durch die Meßungenauigkeit bedingt.

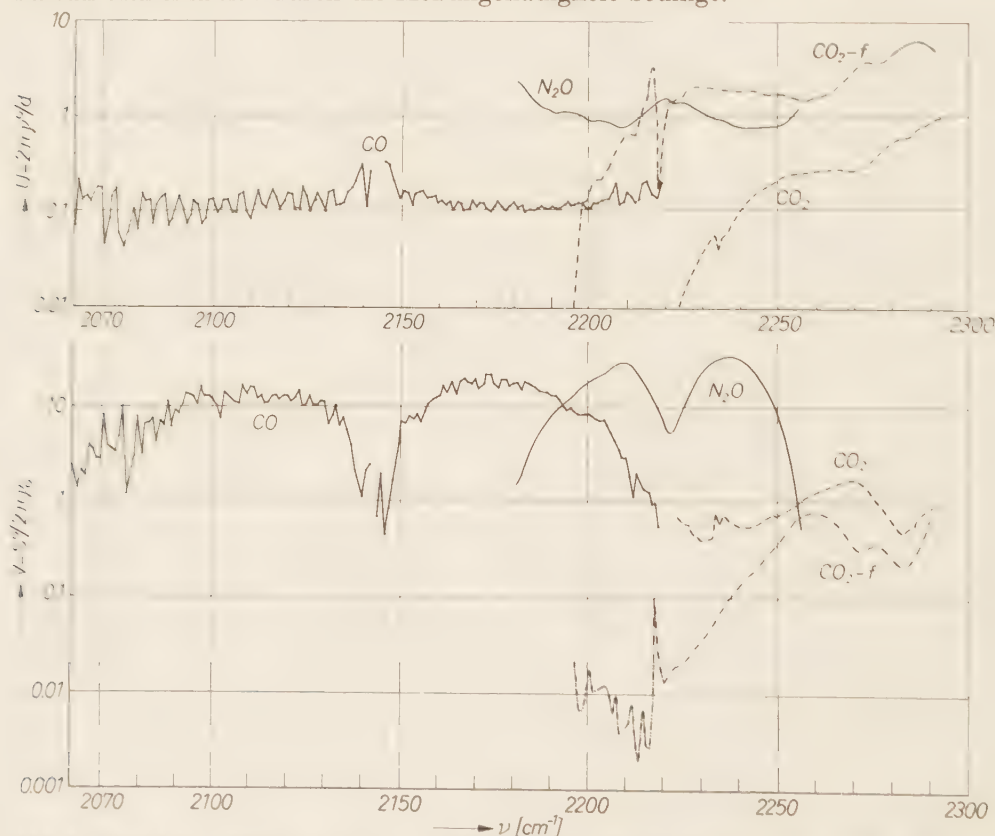


Abb. 2. Bandenmodellparameter. ν – Wellenzahl; S^0 – Linienstärke unter Normalbedingungen; γ^0 – Halbwertsbreite unter Normalbedingungen; f : Parameter, die aus abweichenden Messungen abgeleitet wurden

Mit den abgeleiteten Parametern haben wir über die Gleichungen (9) und (10) gemessene Laborspektren rückberechnet: Abb.3, 4 und 5. Wir finden eine so gute Übereinstimmung, wie sie bisher nach unserer Kenntnis noch nicht anderweitig berichtet werden konnte. Natürlich können aber die zugrunde liegenden Meßwerte nur im Rahmen der Meßgenauigkeit als Absolutwerte betrachtet werden. Zur Untersuchung der Genauigkeit solcher Messungen vergleichen wir die Ergebnisse von LEUPOLT [25] mit denjenigen von BURCH [26], [27], und zwar über die Wachstumskurvendarstellung: Abb.6, 7 und 8. Die Messungen wurden mit der gleichen Apparatur aufgenommen. Selbst bei Berücksichtigung der verschiedenen Auflösung bestehen noch Unterschiede, die als Maß für die Unsicherheit solcher Messungen gewertet werden können. Da derartige Messungen in irgend einer Weise in jede formale Darstellung von Transmissionsfunktionen eingehen, überträgt sich die Unsicherheit der Meßdaten in diese Darstellungen. Es wird vorgeschlagen, diese Auswirkungen auf die Transmission zu untersuchen.

Mit der Darstellung über die Wachstumskurven haben wir ein Mittel zur Auswahl und Kontrolle von Messungen gefunden. Der Vergleich der Messungen von BURCH und LEUPOLT für das Gas CO_2 brachte ein zusätzliches, für uns wichtiges Ergebnis, es ist aus Abb.8 zu entnehmen: während einige der Meßwerte beider Autoren sehr gut übereinstimmen, liegen sämtliche Meßwerte, die mit einer bestimmten Absorptionszelle („4-Meter Zelle“) gemacht wurden, auf einer eigenen, stark abweichenden Wachstumskurve. Leider war die Meßapparatur bei Entdeckung dieser Abweichung durch unsere Diagramme nicht mehr verfügbar. Deshalb konnten keine systematischen Versuche zur Klärung des Effektes angestellt werden. Ein Grund könnte sein, daß die 4-Meter Zelle geringere Adsorption an den Zellwänden hatte.

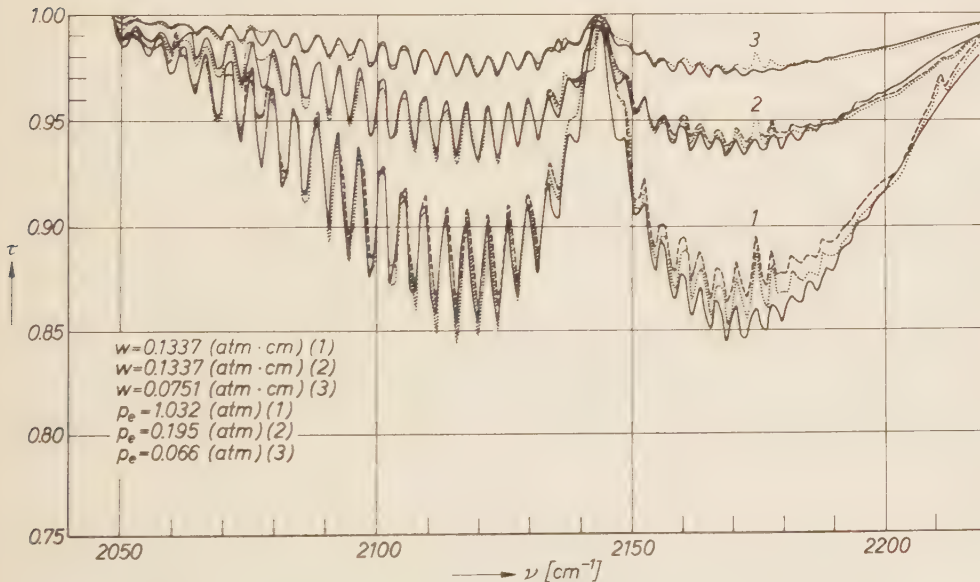


Abb.3. Vergleich von gemessenen und berechneten Spektren des CO . ν = Wellenzahl; τ = Transmission; w = Absorbermasse; p_e = Äquivalentdruck; ——— = Messung; - - - - = berechnet mit dem statistischen Modell; ····· = berechnet mit dem ELSASSER-Modell

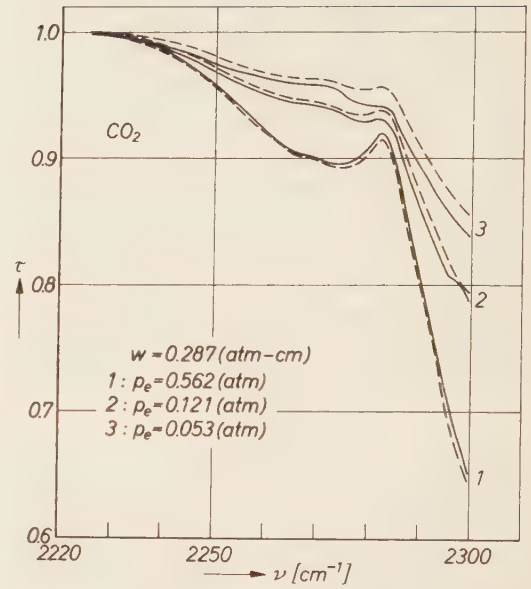
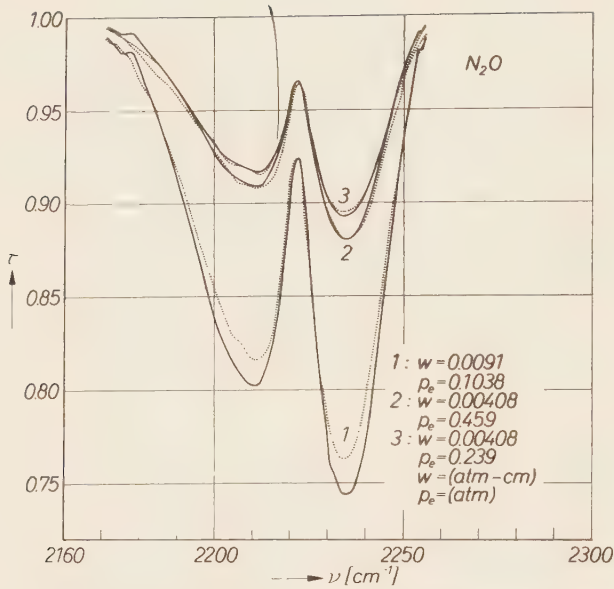


Abb. 4, Abb. 5. Vergleich von gemessenen und berechneten Spektren des N_2O und des CO_2 . ν = Wellenzahl; τ = Transmission; w = Absorbermasse; p_e = Äquivalentdruck; — = Messung; - - - = berechnet mit dem statistischen Modell; ····· = berechnet mit dem ELASSER-Modell

IV. Überlappungseffekte und atmosphärische Emission im 4,5 μm Bereich

A. Bedingungen des Rechenmodells

Wir haben mit dem in Abschnitt I entwickelten Prinzip und mit Gleichung (1) Rechnungen in dem Spektralbereich 2190 bis 2290 cm^{-1} für die Bedingungen der Erdatmosphäre unter der Annahme von thermodynamischem Gleichgewicht durchgeführt. In diesem Spektralbereich überlagern sich die 4,3 μm CO_2 , die 4,7 μm CO und die 4,5 μm N_2O -Bande. Die gegenseitige Position dieser Banden kann man aus Abb. 2 ersehen.

Wir nehmen einen Empfänger an, der in 30 km Höhe vertikal nach unten gerichtet ist, und bei allen Frequenzen die Filterfunktion eins hat. Die Auflösung sei 5 cm^{-1} . Zwischen Erdboden und 30 km Höhe haben wir die Atmosphäre in 50 Schichten eingeteilt. Die Druck-Temperaturverteilung wurde der US-Standardatmosphäre [28] entnommen. Für die einzelnen Gase wurden konstante Mischungsverhältnisse angenommen, deren Werte in der Literatur noch stark schwanken. In Tab. 2 geben wir eine Übersicht über die möglichen Gesamtabsorbermengen (atm-cm):

Tabelle 2

Nr.	CO_2	N_2O	CO	Autor
a)	246,7	0,393	0,158	[28]
b)	256	0,22	?	[16]
c)	246,2	0,236	0,158	verschiedene

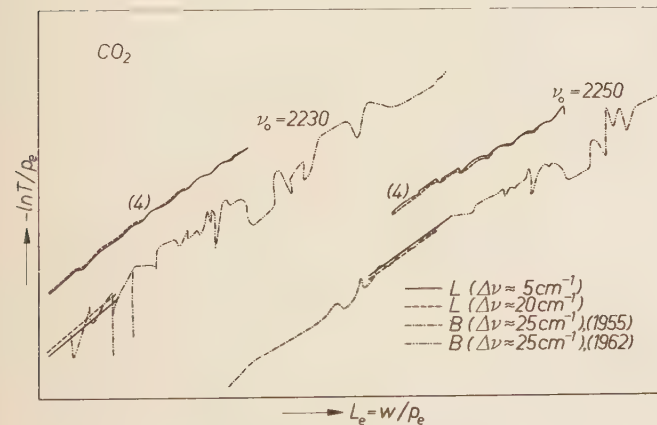
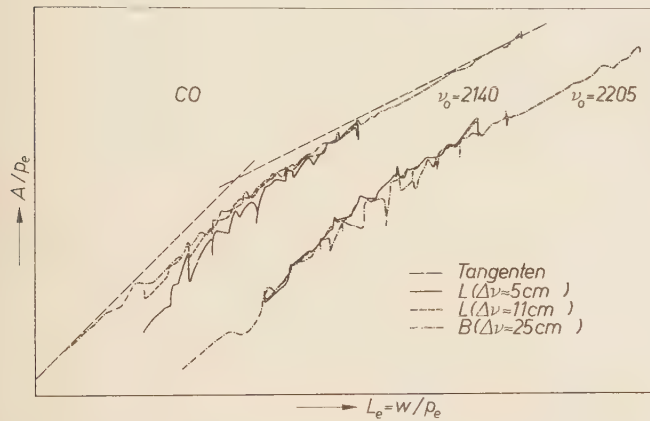
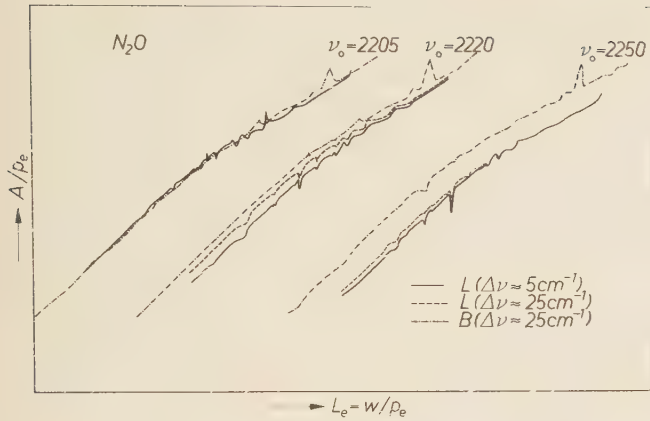


Abb. 6, 7 und 8. Vergleich der Messungen von BURCH (B) und LEUPOLT (L). A = mittlere Absorption im Spektralintervall $\Delta\nu$; T = mittlere Transmission im Spektralintervall $\Delta\nu$; ν_0 = Wellenzahl in der Mitte des Spektralintervalls $\Delta\nu$; $\Delta\nu$ = spektrale Auflösung; w = Absorbermasse; (4) = Messungen mit der 4m langen Absorptionszelle. Skalen wurden nicht angebracht, damit die Kurvengruppen für mehrere Wellenzahlen jeweils in ein Diagramm aufgenommen werden konnten. Die Zacken der Kurven sind bedingt durch die Streuung der Meßwerte, da die zeichnende Maschine alle Punkte durch Linien verbunden hat

B. Diskussion und Ergebnisse der Berechnungen atmosphärischer Spektren

Am Beispiel des $4,5\ \mu\text{m}$ Bereiches vergleichen wir in Abb.9 die spektralen Verteilungen der die Erdatmosphäre verlassenden Strahlung nach Berechnungen von McCLATCHEY [16] (Kurve *Mc*) mit unseren Ergebnissen (Kurve 2). Es wurden verschiedene Ableitungen der Transmissionsfunktionen verwendet (siehe Abschnitt I c). Obwohl der allgemeine Verlauf beider Kurven ähnlich ist, so bestehen doch ganz offensichtliche Unterschiede in den errechneten Absolutwerten des zu erwartenden Spektrums, die den Überlappungseffekt zweier Gase überschreiten können; es besteht zwischen den beiden Methoden bei gleichen Absorbermassen ein Unterschied von mehr als 8 Grad Kelvin in der dem Strahlungsfluß entsprechenden äquivalenten Temperatur bei der Wellenzahl $2238\ \text{cm}^{-1}$. Die Abweichungen liegen etwa in



Abb.9. Spektrum der nach oben gerichteten Strahlung der Erdatmosphäre (in 30 km Höhe) nach verschiedenen Berechnungen. $P(288^\circ\text{K})$ = Schwarzkörperstrahlung bei 288 Grad Kelvin; F = berechneter Strahlungsstrom; ν = Wellenzahl; Kurve 1: berechnet mit unserem Verfahren, bei Verwendung der Absorbermassen a) (Tab. 2). Kurve 2: berechnet mit unserem Verfahren, bei Verwendung der Absorbermassen b) (Tab. 2). Kurve *Mc*: nach Berechnungen von McCLATCHEY [16], bei Verwendung der Absorbermassen b) (Tab. 2). Kurve *S*: wie Kurve *Mc*, jedoch mit Überlagerung einer Spaltfunktion

der gleichen Größenordnung wie solche, die durch die Unsicherheit in dem Mischungsverhältnis der atmosphärischen Gase bedingt sind: Die Kurven 1 und 2 wurden für unterschiedliche, aber mögliche Werte der atmosphärischen Mischungsverhältnisse berechnet. — Gründe für die Unterschiede der Kurven *Mc* und 2 sind:

1. McCLATCHEY hat nur 7 Schichten zwischen 0 und 30 km Höhe angenommen.
2. Er hat Bandenmodellparameter verwendet, die hauptsächlich aus quantentheoretischen Beziehungen abgeleitet wurden (siehe Abschnitt I c), (und unter Zuhilfenahme der Ergebnisse von PENNER).
3. Verschiedene Berücksichtigung des Auflösungsvermögens und der Spaltfunktion.

Punkt 1. könnte leicht durch entsprechende Rechnungen mit Variation der Schichtteilung geklärt werden.

Zur Klärung des Punktes 2. müßten Vergleiche zwischen den Bandenmodellparametern durchgeführt werden, was über eine geeignete Darstellung der Parameter möglich wäre. Zu Punkt 3.: McCLATCHEY hat jeweils in einem 5 cm^{-1} breiten Intervall eine hypothetische Linie angenommen, deren Parameter er bestimmt hat. Diese Annahme stellt bereits eine Mittelungsprozedur dar. Sie könnte etwa als Äquivalent unserer Darstellung betrachtet

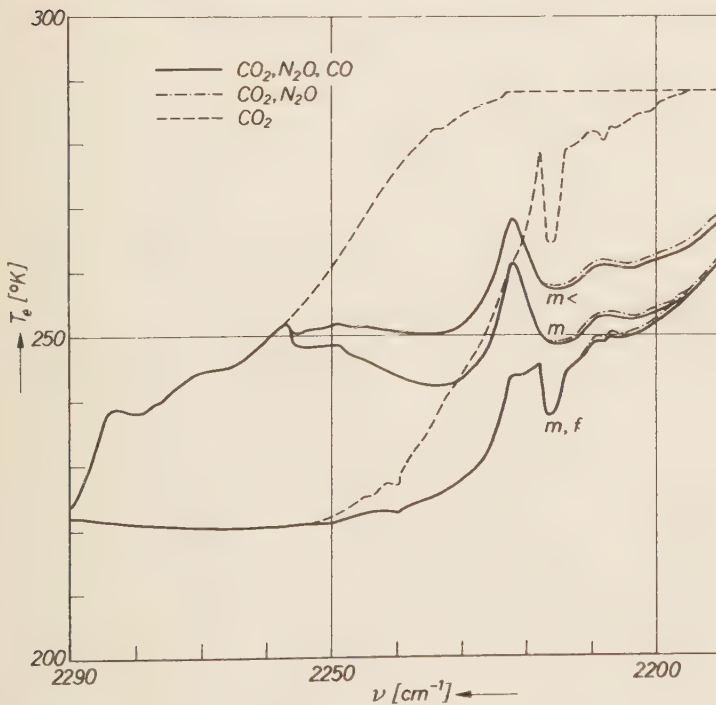


Abb. 10. Spektrum der nach oben gerichteten Strahlung der Erdatmosphäre (in 30 km Höhe). Darstellung über die äquivalente Temperatur. Der Einfluß verschiedener Absorbermassen und der Absorptionsfunktion wird gezeigt. Kurve *m*: Absorbermassen a) (Tab. 2), normale Bandenmodellparameter (Abb. 2). Kurve *m, f*: wie Kurve *m*, jedoch unter Verwendung abweichender Bandenmodellparameter $\text{CO}_2\text{-f}$ (aus Abb. 2) Kurve *m <*: Absorbermassen c) (Tab. 2), normale Bandenmodellparameter (Abb. 2)

werden, die mit einer Auflösung von 5 cm^{-1} gemessenen Absorptionen in Termen der Äquivalentbreite einer Linie zu formulieren — wenngleich wir über den Linienabstand in unseren Rechnungen keine Annahme machen: wir betrachten unsere Bandenmodellparameter nur als Mittelwerte über 5 cm^{-1} breite Intervalle, entsprechend der Auflösung der Messungen. Die Spaltfunktion ist durch die Messungen in diesem Mittelungsprozeß bereits enthalten. McCATCHY überlagert seinen Rechnungen noch eine Spaltfunktion und führt damit noch eine weitere Mittelungsprozedur ein und gewinnt damit die stark geglättete Kurve *S*. Möglicherweise ist diese Art der Mittelung zu stark. Die Ergebnisse nach unserem Verfahren zeigen jedenfalls eine wesentlich feinere Struktur. Unsere Rückberechnung von Laborspektren (Abb. 3, 4 und 5) der gleichen Auflösung zeigt auch, daß wir bezüglich der spektralen Struktur richtig arbeiten.

In Abb. 10 geben wir die spektrale Verteilung der die Erdatmosphäre verlassenden Strahlung in der bekannten Formulierung durch die äquivalente Strahlungstemperatur. Der Vergleich der Kurven *m* und *m* < zeigt den Einfluß der Unsicherheit über das Mischungsverhältnis des N_2O , wie sie in der Literatur anzutreffen ist.

Die Kurve *m*, *f* wurde mit den in Abb. 2 gegebenen abweichenden Bandenmodellparametern CO_2 —*f* berechnet, welche aus den Messungen mit der 4 Meter langen Absorptionszelle abgeleitet wurden. Durch die Parameter CO_2 —*f* werden Abweichungen bis zu 30°K in der äquivalenten Temperatur verursacht.

C. Diskussion und Ergebnisse der Berechnung von Gewichtsfunktionen und Emissionshöhen

Nach den Erläuterungen des Abschnitts I D sind für die Auswahl von Spektralbereichen zu Inversionsexperimenten die Gewichts- und Produktfunktionen von großer Bedeutung. Die Lagen ihrer Maxima geben die Höhen der hauptsächlich emittierenden Schichten an. Das atmosphärische Temperaturprofil bewirkt über die PLANCK-Funktion und deren Frequenzabhängigkeit eine starke Verschiebung der Maxima der Produktfunktionen gegenüber jenen der Gewichtsfunktionen.

Am Beispiel der Wellenzahl 2240 cm^{-1} zeigen wir den Einfluß verschiedener Faktoren auf Gewichts- und Produktfunktionen: Abb. 11 und 12; die existierende Unsicherheit über die in der Erdatmosphäre anzunehmende N_2O -Masse bewirkt bei dieser Wellenzahl einen Höhenunterschied von etwa 1 km für das Maximum der Gewichtsfunktion und von 2 km für das der Produktfunktion. Die aus Messungen mit der 4 Meter-Zelle stammenden abweichenden Absorptionsfunktionen verschieben das Maximum der Gewichtsfunktion um etwa 6 km und das der Produktfunktion um etwa 2,5 km. Das Spektrum der Maxima von Gewichts- und Produktfunktionen ist in Abb. 13 gegeben:

Zwischen 2235 bis 2260 cm^{-1} bleiben die Maxima der Gewichtsfunktionen etwa gleich hoch: der Abfall der langwelligen Seite der $4,3\text{ }\mu\text{m}$ CO_2 -Bande wird kompensiert durch den Anstieg der kurzwelligen Seite der $4,5\text{ }\mu\text{m}$ N_2O -Bande. Die Maxima der Produktfunktionen liegen in diesen Bereichen tiefer und keinesfalls gleich hoch.

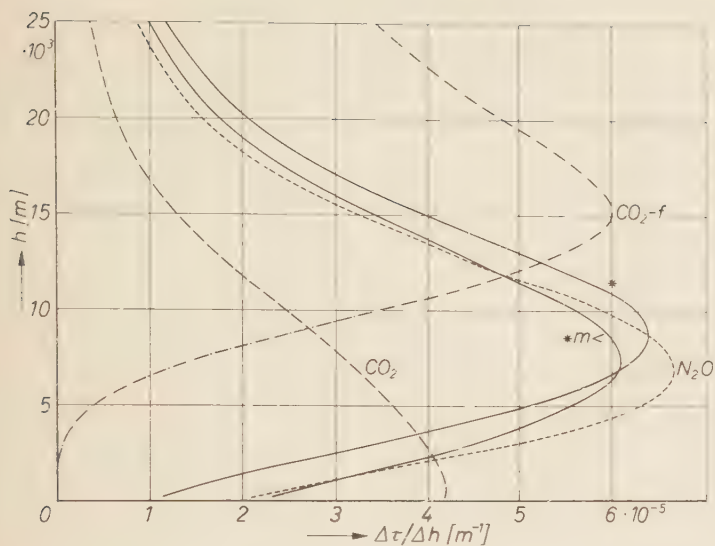


Abb. 11.

Gewichtsfunktionen bei $\nu_0 = 2240 \text{ cm}^{-1}$

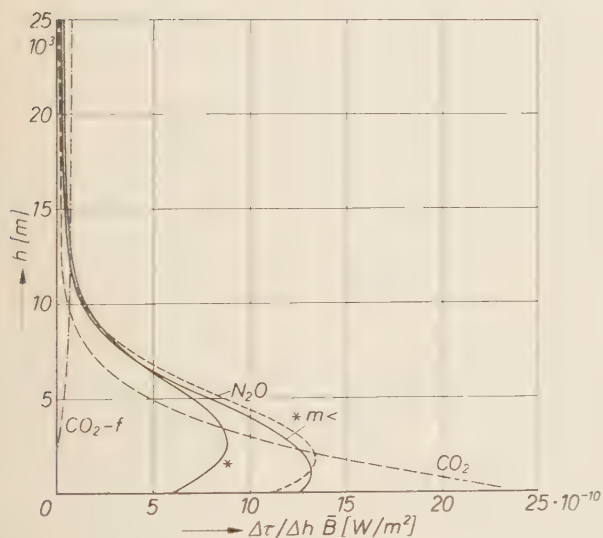


Abb. 12.

Produktfunktionen bei $\nu_0 = 2240 \text{ cm}^{-1}$

ν_0 = Wellenzahl, h = Höhe, τ = Transmission, $\bar{B}$ = Mittelwert der PLANCKschen Strahlung für den, dem Höhenintervall Δh zuzuordnenden Temperaturbereich. Kurve*: N_2O und CO_2 sind in der Rechnung berücksichtigt bei Verwendung der Absorbermassen a) (Tab. 2). Kurve *m: wie die Kurve *, nur wurden die etwas kleineren Absorbermassen c) aus Tab. 2 verwendet. Kurve N_2O , bzw. CO_2 bzw. CO_2 -f: nur das Gas N_2O bzw. CO_2 bzw. CO_2 -f wurde in der Rechnung berücksichtigt, bei Verwendung der Absorbermasse aus Tab. 3a)

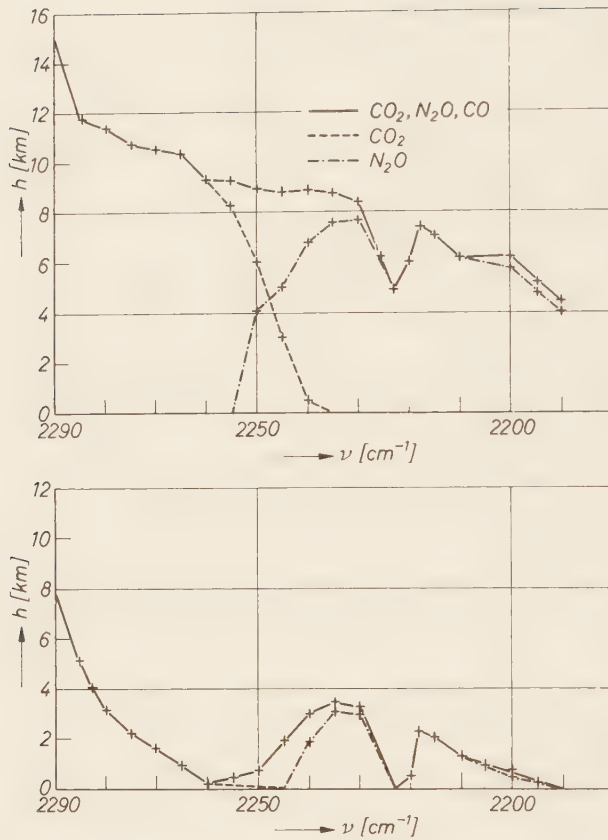


Abb.13. Spektren der Maxima der Höhen von Gewichts- und Produktfunktionen. Oberes Diagramm: Gewichtsfunktionen, unteres Diagramm: Produktfunktionen. ν = Wellenzahl, h = Höhe

Die Diskrepanz zwischen verschiedenen Rechenverfahren zeigt die Gegenüberstellung der Höhen h [km] der Maxima der Gewichts- bzw. Produktfunktionen nach McCLATCHEY und unseren Rechnungen in Tab. 3:

Tabelle 3

ν_0	Maximum von $\left(\frac{d\tau}{dh}\right)$		Maximum von $\left(\frac{d\tau}{dh} B\right)$	
	h_{wir}	h_{Mc}	h_{wir}	h_{Mc}
2235	6,8	> 6,3	1,2	> 0,0
2260	9,3	> 8,2	0,2	< 4,2
2285	11,8	< 14,5	4,9	< 9,9

Die Unterschiede der beiden Verfahren haben wir bereits in Abschnitt IV B skizziert.

Selbst wenn man berücksichtigt, daß McCLATCHEY bei diesen Funktionen eine Auflösung von 25 cm^{-1} eingesetzt hat, während wir mit 5 cm^{-1} arbeiten, ist zu untersuchen, weshalb bei 2260 cm^{-1} McCLATCHEY ein höheres Maximum der Produktfunktion findet als wir, während die Relation bei den Gewichtsfunktionen gerade umgekehrt ist. Auch fällt auf, daß bei ähnlich hohen Gewichtsfunktionen ein großer Unterschied in den Produktfunktionen besteht. Der Grund hierfür könnte darin zu suchen sein, daß seine Teilung der Atmosphäre in 7 Schichten für die Bestimmung von Produktfunktionen zu grob ist. Wir ordnen z.B. die Strahlung bei 2285 cm^{-1} der unteren Troposphäre zu, während McCLATCHEY sie der oberen Troposphäre zuordnet.

In Abb. 14 zeigen wir die Transmission der Atmosphäre zum Weltraum (30 km Höhe) hin. Zwischen je zwei aufeinanderfolgenden gleichartigen Kurven besteht ein Höhenabstand von 2 km. Der Verlauf der Differenz je zweier Kurven auf einer zur Ordinate parallelen Linie kann als Maß für den Verlauf der sogenannten Gewichtsfaktoren $\Delta\tau = \int \left(\frac{d\tau}{dh} \cdot dh \right)$ betrachtet werden. Wie sich der Verlauf dieser Gewichtsfaktoren durch die Bandenüberlappung ändert, kann man einem Vergleich mit entsprechenden Gewichtsfaktoren aus den Diagrammen der Transmissionen der Einzelgase (Abb. 15 und 16) entnehmen, wie z.B. bei der Wellenzahl 2245 cm^{-1} gezeigt ist. Ähnliche Darstellungen für die Produktfunktionen sollen hier nicht gezeigt werden.

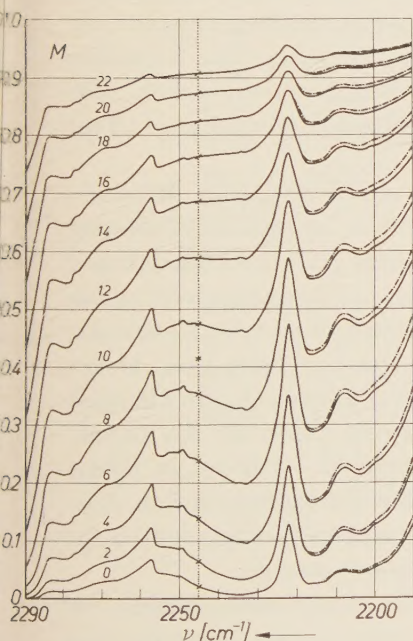


Abb. 14

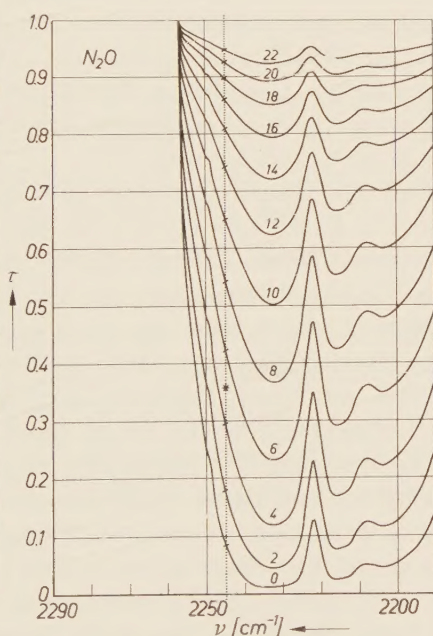


Abb. 15

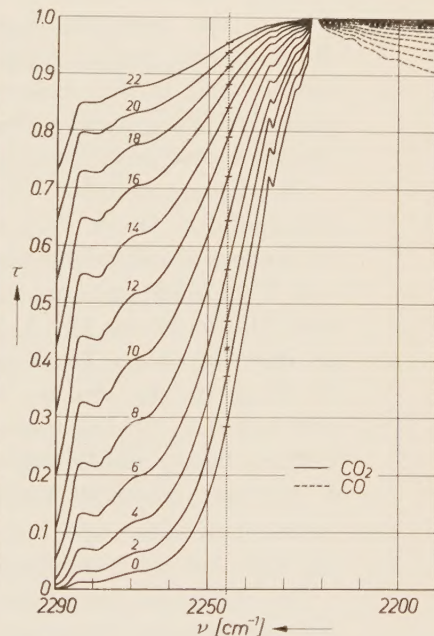


Abb. 16

Transmission zwischen verschiedenen Höhen in der Erdatmosphäre und dem „Weltraum“ (30 km)
 τ = Transmission; ν = Wellenzahl; Kurve M: alle drei Gase N_2O , CO_2 , CO wurden berücksichtigt;
 Kurven N_2O : nur N_2O wurde berücksichtigt; Kurven CO_2 , bzw. CO : nur CO_2 bzw. CO wurde berücksichtigt.
 Die Zahlen an den Kurven geben die betrachtete Höhe in km an.

* in dem so bezeichneten Höhenintervall liegt jeweils das Maximum der Gewichtsfunktion bzw. des Gewichtsfaktors.

VI. Schluß

Die herkömmlichen Verfahren der Bestimmung von Transmissionsfunktionen sind langwierig und deshalb in manchen Problemen der Interpretation von Spektren schlecht anwendbar. Wir haben ein neues Prinzip der Bestimmung von Transmissionsfunktionen so erweitert und verallgemeinert, daß damit der Überlappungseffekt an Labormessungen (Multiplikativität) und der Überlappungseinfluß auf die Bestimmung der atmosphärischen Emission untersucht werden kann. Es wurde in vereinfachter Form auf den $4,5\ \mu\text{m}$ Bereich angewendet; einige der angegebenen Entwicklungen wurden nicht in die numerischen Rechnungen eingeführt, nämlich die Untersuchungen für gemischte Linienprofile, sowie höhere Approximationen der VAN DE HULST-Technik (Rechnungen über inhomogene Wege).

Mit Hilfe des entwickelten Verfahrens wurden in den uns zur Verfügung stehenden Messungen Abweichungen entdeckt, die zur Ausscheidung der Messungen an Gasgemischen zwangen. Als Folge konnte die Multiplikativität der Transmissionsfunktionen am aktuellen Beispiel nicht kontrolliert werden. Nach Abschluß der vorliegenden Arbeit traf von Prof. J. H. SHAW die Auskunft ein, daß diejenige Absorptionszelle, welche die fraglichen Messungen geliefert hatte, seit den Messungen von BURCH eine andere Innenoberfläche (Teflon) erhalten hat. Adsorption als Erklärungsmöglichkeit wäre also zu diskutieren, doch müßten noch genauere Untersuchungen angestellt werden.

Der Vergleich der Ergebnisse der atmosphärischen Emission zeigt für den allgemeinen Verlauf der Spektren Ähnlichkeit mit entsprechenden, vergleichbaren Ergebnissen von McCLATCHEY, doch bestehen im Detail noch wesentliche Abweichungen. Die Ursachen hierfür sind in den unterschiedlichen Grundlagen der beiden Verfahren zu suchen. Für eine zuverlässige Interpretation von Spektren erscheinen daher weitere Untersuchungen über die anzuwendenden Grundlagen als wünschenswert.

Die Untersuchungen wurden am Meteorologischen Institut der Universität München durchgeführt. Herrn Professor Dr. F. MÖLLER bin ich für seine stete anregende Förderung zu großem Dank verpflichtet. Herrn Dr. H. J. BOLLE danke ich sehr für viele Diskussionen und Ratschläge und vor allem für die Ermöglichung der Messungen. Besonders verbunden aber bin ich Herrn Dr. A. LEUPOLT, der in sehr entgegenkommender Weise die Messungen an der Ohio State University durchgeführt hat. Mein größter Dank gebührt ihm. Herrn Dr. R. A. HANEL von der NASA und Herrn Professor J. H. SHAW danke ich für klärende und hilfreiche Diskussionen. Letztgenanntem bin ich zu besonderem Dank für die Bereitstellung seines Labors zur Durchführung der Messungen verpflichtet. — Ich danke Herrn F. LEHNER, Herrn K. ZECHMEISTER und Herrn G. KOPFMANN für die umfangreichen Programmierarbeiten und Fräulein H. KAUFMANN und vielen ungenannten Werkstudenten für die Hilfe bei der Digitalisierung und Verarbeitung des großen Datenmaterials.

Die National Aeronautics and Space Administration und das Bundesministerium für wissenschaftliche Forschung haben durch ihre finanzielle Unterstützung die Durchführung der Arbeit ermöglicht.

Lebenslauf

Am 28. Januar 1935 wurde ich als zweites von drei Kindern des Mittelschullehrers Richard Tannhäuser und seiner Ehefrau Elfriede, geb. Balke in Breslau geboren. Meine Kindheit verbrachte ich in Breslau, Leutmannsdorf (Schlesien) und Herzogenaurach (Oberfranken), wo ich von 1941 bis 1945 die Volksschulen besuchte. Seit 1945 besuchte ich dann die Marie-Theresien-Oberrealschule in Erlangen und seit 1951 den naturwissenschaftlichen Zweig der Ohm-Oberrealschule am gleichen Ort. Dort bestand ich 1954 die Reifeprüfung

Im Wintersemester 1954/55 begann ich das Studium der Physik und Meteorologie an der Ludwig-Maximilian-Universität in München. Dort legte ich im August 1957 die Diplomvorprüfung in Physik ab. Nach Anfertigung einer experimentellen Diplomarbeit am Institut für medizinische Optik bestand ich die Diplom-Hauptprüfung in Physik an der gleichen Universität im Juli 1962.

Seit dem Abitur übte ich während der Semesterferien als Werkstudentin verschiedene, der Physik naheliegende Tätigkeiten aus, meistens bei der Firma Siemens & Schuckert in Erlangen. Nach dem Hauptdiplom nahm ich vorübergehend eine Stelle als Physikerin bei den Erma-Werken in Dachau an.

Seit 1. Februar 1963 bin ich am Meteorologischen Institut der Universität München, wo ich seit August 1964 diese Dissertation angefertigt habe.

